

Difficultés d'import et propositions d'évolution pour ...



FAME, c'est:

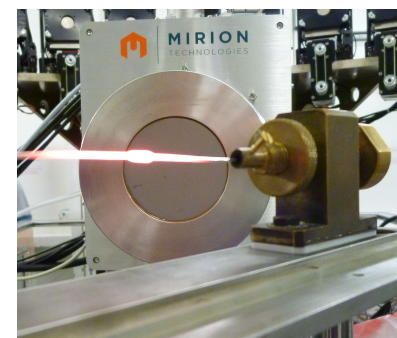
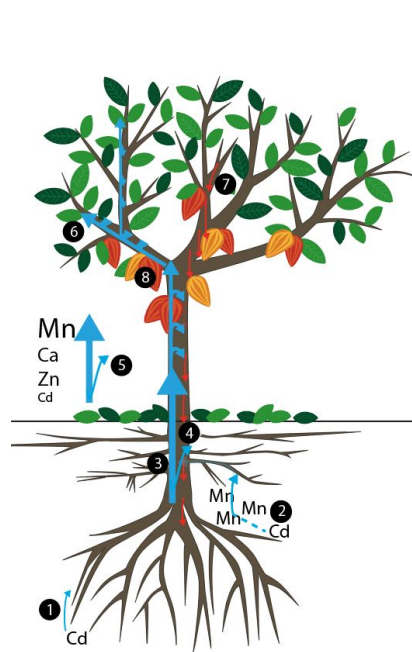
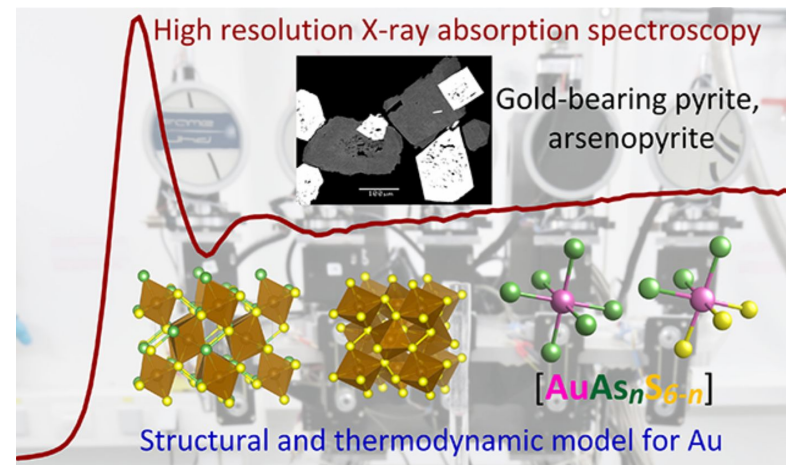
- 2 lignes de lumière de l'ESRF (rayons X)
- 400 utilisateurs par an
- 50 expériences par an
 - ~ 10 spectres de référence
 - autant d'échantillons
 - Sciences de la Terre
 - Biochimie
 - Matériaux

FAME ∈ ESRF → Data Portal

FAME
649 spectra

SSHAD/FAME, c'est:

- 86 EXPERIMENTALISTS
- 674 SPECTRA
- 380 SAMPLES



Nos besoins / souhaits

(par ordre de priorité)

1/ Simplification de l'import:

- en premier lieu pour la **création des phases** (minimum de détails, liens vers des bases existantes : COD, Materials Project, Data Terra ?) + **import autonome** par l'utilisateur.
- si possible, **citation des publis** avec simplement le DOI, sans besoin de les importer.
- **Experimentalists** : contraintes des dates de contrats

Nos besoins / souhaits

(par ordre de priorité)

1/ Simplification de l'import:

- en premier lieu pour la **création des phases** (minimum de détails, liens vers des bases existantes : COD, Materials Project, Data Terra ?) + **import autonome** par l'utilisateur.
- si possible, **citation des publis** avec simplement le DOI, sans besoin de les importer.
- **Experimentalists** : contraintes des dates de contrats

2/ Compléments d'information :

- possibilité d'**associer des fichiers (cif, pdf)**, aux phases, aux échantillons, aux expériences; **input files** des spectres simulés
(cela existe peut-être déjà sans qu'on le sache).

Nos besoins / souhaits

(par ordre de priorité)

1/ Simplification de l'import:

- en premier lieu pour la **création des phases** (minimum de détails, liens vers des bases existantes : COD, Materials Project, Data Terra ?) + **import autonome** par l'utilisateur.
- si possible, **citation des publis** avec simplement le DOI, sans besoin de les importer.
- **Experimentalists** : contraintes des dates de contrats

2/ Compléments d'information :

- possibilité d'**associer des fichiers (cif, pdf)**, aux phases, aux échantillons, aux expériences; **input files** des spectres simulés
(cela existe peut-être déjà sans qu'on le sache).

3/ Configuration de l'export:

- Pour une utilisation « par l'**homme** », à la suite d'une recherche donnant N spectres, récupération de **N fichiers csv avec les données** = utilisation rapide et recherche ultérieure dans les métadonnées
- Pour une utilisation « par une **machine** », toutes les **méta-données** d'un spectre **dans 1 seul fichier** (xml?) puis éventuellement converties selon le standard Nexus par les gestionnaires de sshade/fame.

Ce qui se passe de notre côté

1/ Collecte des métadonnées

- L'ESRF travaille sur la collecte **automatique** des métadonnées du sample (au standard Nexus) depuis les déclarations des utilisateurs.
 - utilisation possible pour pré-remplir les xml.

Ce qui se passe de notre côté

1/ Collecte des métadonnées

- L'ESRF travaille sur la collecte **automatique** des métadonnées du sample (au standard Nexus) depuis les déclarations des utilisateurs.
 - utilisation possible pour pré-remplir les xml.

2/ Interactions avec données SSHADE/FAME

- Référencement de SSHADE/FAME sur **International XAFS DB Portal** (Japon) :
 - <https://ixdb.jxafs.org/>
 - sur la base d'une liste à un instant t (export D.A.) puis intégration à la main (Japon)
 - **Question** : comment mettre à jour cette liste périodiquement ?

International XAFS DB Portal

Links for Molybdenum(IV) oxide

<https://mdr.nims.go.jp/concern/datasets/7p88ck21q> (SPring-8)
<https://mdr.nims.go.jp/concern/datasets/k930c023q> (SPring-8)
https://www.sshade.eu/data/spectrum/SPECTRUM_PA_20180702_001 (SSHADE/FAME)

Direct data download

https://mdr.nims.go.jp/download_all/7p88ck21q.zip (SPring-8)
https://mdr.nims.go.jp/download_all/k930c023q.zip (SPring-8)

Related crystal structures

[P 1 21/c 1](#)
[P 42/m n m](#)
[P n m a](#)

Related phase diagram

[CPDDB](#) (NIMS MatNavi [registration](#))

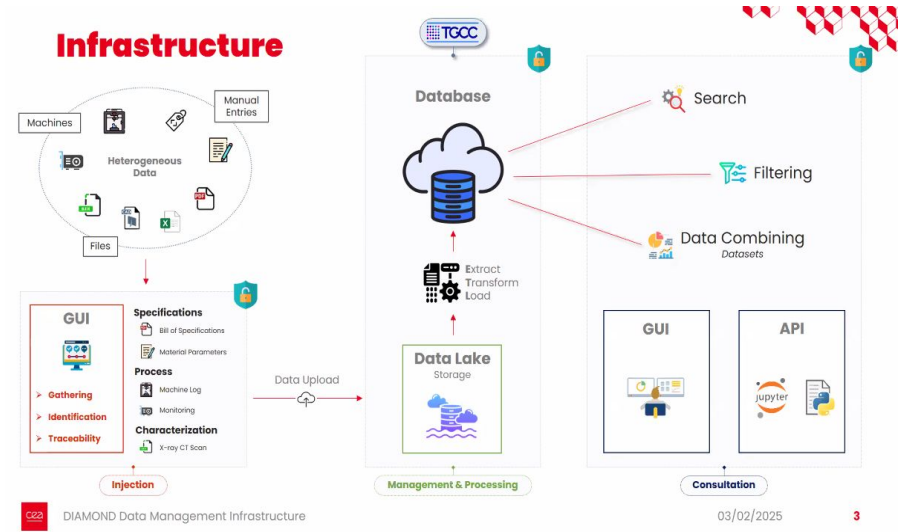
Related properties

[Materials project for MoO2](#)
[AtomWork](#) (NIMS MatNavi [registration](#))

Merci

Positionnement par rapport à d'autres bases de données

- FAME participe au **projet Diamond**



- FAME participe au réseau **REGEF**

